

Сравнение результатов, полученных в рамках перечисленных выше моделей показало, что результаты хорошо коррелируют друг с другом.

По зависимостям скорости гетерообмена и коэффициента диффузии кислорода от температуры в аррениусовских координатах рассчитаны энергии активации процессов обмена и диффузии кислорода.

1. Ezin A.N., Tsidilkonski V.I., Kurumchin E. Kh. Solid State Ionics, 1996, v. 84, pp: 105.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Никитин А. Н., Ряшко Л. Б.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Реакция Белоусова-Жаботинского, по-видимому, является наиболее детально изученной колебательной реакцией. Важность этой реакции объясняется тем, что, несмотря на свою химическую сложность, она проста в математическом отношении по сравнению со многими биологическими осцилляторами. Колебательные химические процессы представляют интерес не только для химиков в связи со сложностью их механизма, но также для биологов по причине того, что многие биологические ферментативные и управляющие процессы являются процессами с обратной связью.

Количественно колебательные химические реакции описываются моделью системы дифференциальных уравнений. Наиболее известными являются модель брюсселятора для гипотетического химического процесса и модель Филда-Кёрёса-Нойеса, еще называемая орегонатором или ФКН-моделью, описывающая реакцию Белоусова-Жаботинского.

Более интересны в своем поведении системы, в которых химические колебательные реакции рассматриваются как часть процессов, происходящих в системе. В системах, где химические процессы сочетаются еще и с диффузией компонентов, диффузия может играть как стабилизирующую, так и дестабилизирующую роль, поэтому в физико-химических, биохимических процессах необходимо ее учитывать. Диффузионная неустойчивость приводит к возникновению в исследуемых системах пространственных структур.

Поскольку скорость химических реакций и концентрации являются макроскопическими величинами, для более полного рассмотрения системы необходимо учитывать их флуктуации. С учетом флуктуаций моделирование процесса может быть проведено численным решением системы стохастических дифференциальных уравнений (СДУ).

В данной работе составлена процедура, с помощью которой получены численные решения системы уравнений для различных параметров

модели, получены основные характеристики устойчивости решений в зависимости от параметров. Проведено численное моделирование переноса компонентов с учетом диффузии компонентов и анализ влияния диффузии на распределение компонентов в системе. Также получено численное решение системы СДУ для модели брюсселятра с различными параметрами.

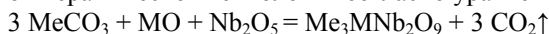
ТВЕРДОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

$\text{Me}_3\text{MnNb}_2\text{O}_9$ (Me – Ca, Sr, Ba; M – Zn, Cu)

Голуб Е.М., Смирнова О.А., Кудакеева С.Р., Штин С.А.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Целью настоящей работы является исследование родственных фаз состава $\text{Me}_3\text{MnNb}_2\text{O}_9$ (Me=Ca, Sr, Ba; M=Zn, Cu). Все образцы получены по стандартной керамической технологии согласно уравнению реакции:



При выборе условий синтеза учтены температуры плавления исходных веществ и их летучесть. Контроль за температурой осуществляли с помощью Pt-PtRh термодпары в комплекте с вольтметром Ф-295-4. Точность поддержания температуры $\pm 5^\circ\text{C}$. Режимы твердофазного синтеза приведены в таблице.

Соединение	Температура отжига,	Время отжига,
$\text{Me}_3\text{MnNb}_2\text{O}_9$ (Me- Ca, Sr, Ba, M-Zn, Cu)	700	6
	800	6
	950	6
	1100	6
$\text{Sr}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$ $\text{Ba}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$	1080	6

Однофазность исследуемых образцов определяли методом рентгенофазового анализа (дифрактометр ДРОН-2.0, CuK_α -излучение). Полученные значения межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей сравнивали с имеющимися литературными данными для исходных веществ и известных соединений. На данный момент однофазными получены соединения $\text{Sr}_3\text{ZnNb}_2\text{O}_9$ и $\text{Ba}_3\text{ZnNb}_2\text{O}_9$.

В работе исследованы температурные зависимости электропроводности образцов, изучена их химическая устойчивость и выделены наиболее перспективные фазы для дальнейшего исследования.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Минобразования и CRDF, BRHE 2004 post-doctoral fellowship award Y2-C-05-14; гранта CRDF № EK-005-X1.